

Рис.3 - B3LYP/6-311++G(3df) спин-поляризованный расчет реакции димеризации гидроперекисного радикала $\text{HO}\cdot$ с генерацией синглетного кислорода $\text{O}_2(^1\Delta_g)$:

(а) - рассчитанная структура циклического димера (ЦД);
(б) - структура переходного состояния (ПС).

Таким образом, нами обоснован процесс активации и связывания молекулярного азота в виде N_2O через взаимодействие N_2 с гидроперекисными радикалами $\text{HO}\cdot$ в возбужденном состоянии, которое сенсibilизировано синглетным кислородом $\text{O}_2(^1\Delta_g)$. Генерирование $\text{O}_2(^1\Delta_g)$ через димеризацию радикалов $\text{HO}\cdot$ с последующей сенсibilизацией возбужденного состояния $\text{HO}\cdot$ можно рассматривать как один из механизмов синергетического эффекта при окислении субстрата в присутствии перекисных радикалов.

1. *Нагиев, М.Ф.* Связывание азота в виде его закиси / [М.Ф. Нагиев, Т.М. Нагиев, Ф.А. Асланов и др.] - ДАН СССР. - 1973. - Т. 213. - № 5. - с.1096 - 1098.
2. *Нагиев, Т. М.* Сопряженные реакции окисления перекисью водорода / Т. М. Нагиев - Успехи химии. - 1985. - Т. 54. - № 10. - с.1654 - 1673.
3. *Minaev, B.F.* Photochemical Water Decomposition in the Troposphere: Density Functional Study with a Symmetrized Kohn-Sham Formalism / [B.F.Minaev, I.I. Zakharov, A.B. Tselishev et al.] - ChemPhysChem - 2010. - Vol. 11. - № 18. - P. 4028-4034.
4. *Минаев, Б.Ф.* Расчет анизотропии g-фактора по методу ППДП с учетом COB / Б.Ф. Минаев - Оптика и спектроскопия - 1974. - Т. 36. - №2. - с. 275-279.
5. *Xu, X.* The gas phase reaction of singlet dioxygen with water: a water-catalyzed mechanism / [X. Xu, R.P. Muller, W.A. Goddard III.] - Proc. Natl. Acad. Sci. USA. - 2002. - Vol. 99 - № 6. - p.3376 - 3381.

МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ ФОРМУВАННЯ ЛИЦЬОВОГО ШАРУ ТРОТУАРНОЇ ПЛИТКИ

Путієнко Т.В., Статюха Г.О.

Національний технічний університет України «КПІ», taras.v@meta.ua

Найбільш ефективним способом виробництва тротуарної плитки на сьогодні є об'ємне напісху вібпресування. Вироби, отримані в такий спосіб, мають високі експлуатаційні характеристики при високій продуктивності виробництва. Формувальні машини, що використовуються у виробництві тротуарної плитки дозволяють формувати двохшарову плитку. Така плитка має основний шар який забезпечує високі експлуатаційні характеристики і лицьовий (фактурний) шар товщиною близько 4–6 мм, який у своєму складі додатково містить барвник. Така технологія виробництва дозволяє отримувати тротуарну плитку будь-яких кольорів без суттєвого підвищення собівартості. Крім того, за наявності відповідного обладнання, технологія вібпресування дозволяє розширити асортимент тротуарної плитки використанням технології "ColorMix", яка полягає у не повному змішуванні кількох різнокольорових бетонних сумішей при формуванні фактурного шару тротуарної плитки. Зазвичай, для виробництва плитки "ColorMix" необхідне додаткове обладнання, яке здебільшого пропонують такі іноземні компанії як "WuerschumGmbH", "HESSMaschinenfabrikGmbH&Co.KG" і "MasaGmbH". Встановлення такого обладнання

потребує значних капіталовкладень, тому в більшості випадків є економічно не обґрунтованим. З іншого боку, аналіз технічних можливостей сучасного формуючого обладнання показав існування можливості отримання тротуарної плитки з властивостями наближеними до "ColorMix" використовуючи функціональні особливості деяких формуючих машин, які мають бункер для бетонної суміші фактурного шару із додатковим шибром. Недоліком такого підходу є складність прогнозування результату отриманого при такому змішуванні.

На основі результатів експериментів по отриманні плитки "ColorMix" на формуючій машині HESS MULTIMAT RH1500, для прогнозування вигляду фактурного шару сформованої тротуарної плитки було запропоновано імітаційну модель виду:

$$h = f(x, y, v, p) \quad (1)$$

де x, y – координати точки на площині сформованого зразка тротуарної плитки у кодованій формі; h – умовне значення висоти на якій у бункері розміщується зразок суміші, що ймовірно потрапить у точку з координатами x, y ; v – повний об'єм суміші у бункері, м^3 ; p – випадковий параметр на відріжку $[0, 1]$.

Основна складність отримання такої моделі полягає в тому, що необхідно спочатку пов'язати колір кожної точки зображення тротуарної плитки, отриманої у результаті експерименту, з висотою на якій у бункері розміщується шар суміші, зразок якої ймовірніше за все потрапив у дану точку. Для цього потрібно ввести наступні припущення:

- стінки бункера вважати вертикальними (таким чином висота усіх шарів суміші буде пропорційна їх об'єму);
- знехтувати формою поверхні насипу суміші у бункері – вважати плоскою.

Знаючи кількість шарів кольорових сумішей, порядок їх завантаження у бункер та колір суміші кожного шару можна провести класифікацію точок зображення за кольором. Для вирішення цієї задачі у роботі використовується конкуруюча нейронна мережа, яку ще називають шаром Кохонена [1]. Даний вид нейронних мереж, як правило використовується для кластеризації даних. Використати дану мережу для класифікації даних дозволяє наявність режиму тренування. Отримана в результаті «тренувана» нейронна мережа здатна відносити будь-яку точку зображення до одного із заданих класів. Результатом класифікації конкуруючою нейронною мережею є матриця, що містить значення, які відповідають номерам шарів колір яких найбільш подібний кольору відповідної точки. Графічна інтерпретація результатів класифікації точок одного з зображень наведено на рис. 1.

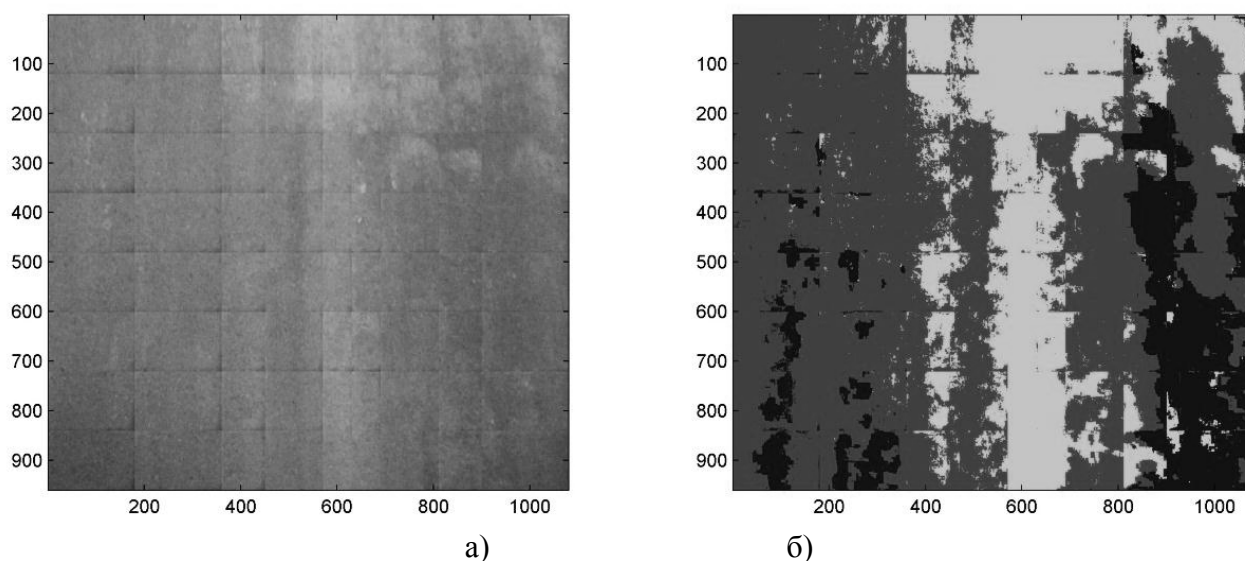


Рис. 1 – Результатів класифікації за кольором:

а – оригінал зображення; б – графічна інтерпретація результату класифікації на три групи.

На основі вибірки результатів класифікації для набору паралельних експериментів було знайдено інтервальний статистичний розподіл ймовірності потрапляння зразка суміші кожного з шарів у певну точку зображення. Для цього номери шарів попередньо було замінено на інтервали висоти $[h_{\min}, h_{\max}]$. Із інтервального статистичного розподілу отримано інтегральний закон розподілу ймовірностей

$$P_i = P_i(h) \quad (2)$$

де i – порядковий номер точки у вибірці, що має координати x, y при загальному об'ємі суміші в бункері v .

Для використання залежності (2) у ролі імітаційної моделі потрібно знайти обернену функцію:

$$h = f_i(P) \quad (3)$$

По суті залежність (3) можна розглядати як набір обернених функцій для кожної точки вибірки. За номером i , точки пов'язані із параметрами x, y та v , тому можна узагальнити залежність (3) привівши до вигляду (1).

Для реалізації моделі загального вигляду були використані різні методи, такі як: інтерполяція, регресійна модель, нейронна мережа і система нейро-нечіткого виведення. Порівняльні характеристики отриманих моделей наведено у табл. 1.

Нейрона мережа має найменшу похибку апроксимацій експериментальних даних, при цьому вона досить гнучко описує закономірності процесу і дозволяє проводити екстраполяцію, тому вона найкраще підходить для подальшого використання. Інтерполяція і система нейро-нечіткого виведення можуть розглядатися як альтернативні варіанти, так як мають деякі корисні властивості, зокрема точність при інтерполяції чи здатність до узагальнення системою нейро-нечіткого виведення. Регресійна модель виявилася дуже грубою і не придатна для подальшого використання.

Таблиця 1 – Характеристики отриманих моделей

Тип моделі	Особливості	Похибка
Інтерполяційна	Лінійна інтерполяція реалізована вбудованими засобами MATLAB (клас TriScatteredInterp)	-
Регресійна	Регресійне рівняння другого порядку	0,12
Нейронна мережа	Двохшарова нейронна мережа прямого поширення, прихований шар складається із 40 нейронів	0,0091 (тестова вибірка)
Система нейро-нечіткого виведення	Блок фазифікації параметра p містить 4 функції приналежності, всі інші по 3; кількість правил – 108; вихідні функції лінійного типу	0,098 (тестова вибірка)

Процес імітаційного моделювання розпочинається із імітації завантаження бункеру. Для цього для кожного шару задається колір, об'єм і положення у бункері, що визначається відрізком висоти залягання даного шару $[h_{\min}, h_{\max}]$. Потім користувач задає бажане розширення результуючого зображення. Проводиться розрахунок координат x, y для кожного пікселя. Далі для кожного пікселя відбувається розрахунок висоти h за моделлю, при цьому кожного разу розігрується нове значення параметра p . Кожному пікселю результуючого зображення надається забарвлення, що відповідає кольору шару суміші, для якого виконується умова:

$$h_{\min} < h \leq h_{\max} \quad (4)$$

Для проведення імітаційного моделювання у системі MATLAB був створений програмний модуль, що має графічний інтерфейс і дозволяє наочно проводити імітацію завантаження бункеру і налаштовувати параметри імітаційного моделювання. Крім цього у програмі передбачена можливість завантаження користувачем власних моделей. Приклад зображення, отриманого у результаті імітаційного моделювання процесу змішування 0,4 м³ червоної суміші і 0,15 м³ білої суміші наведено на рис. 2.

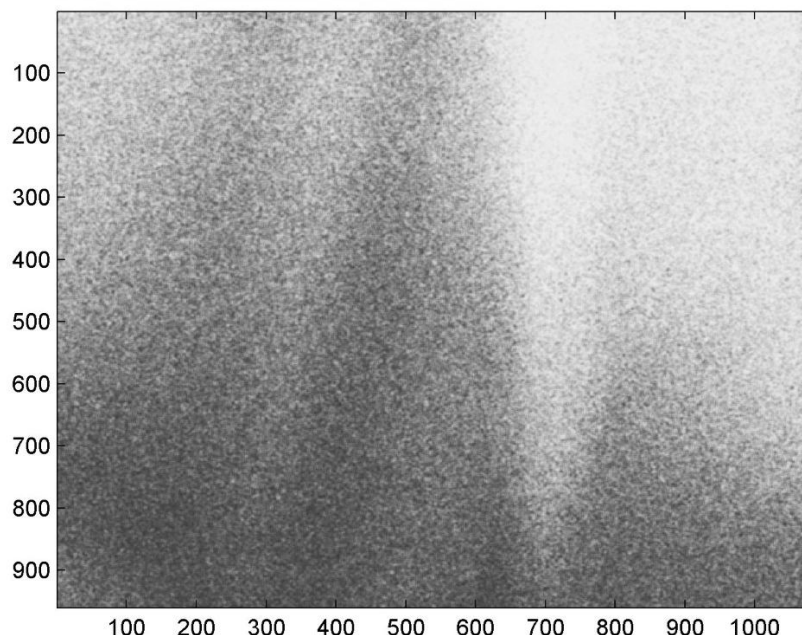


Рис. 2 – Результат імітаційного моделювання

Підводячи підсумки роботи можна зробити висновок щодо можливості математичного опису процесу змішування кольорових напівсухих бетонних сумішей при формуванні фактурного шару двохшарової тротуарної плитки.

1. *Медведев В.С.* Нейронные сети. MATLAB 6/ Под общ. Ред. К.т.н. В.Г. Потемкина.[Текст] / Медведев В.С., Потемкин В.Г. – М.: ДИАЛОГ-МИФИ, 2002. – 496 с.

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАВНОВЕСНЫХ ПРОЦЕССОВ В СИСТЕМАХ

“SO₂ – R₂NCH₂CH₂NR₂ – H₂O”

Хома Р.Е.^{1,2}

¹Физико-химический институт защиты окружающей среды и человека,

²Одесский национальный университет имени И. И. Мечникова, rek@onu.edu.ua

В продолжение исследований равновесных процессов в системах “оксид серы (IV) – амины – вода” [1, 2] проведено компьютерное моделирование взаимодействия в системах “оксид серы (IV) – 1,2-диамин – вода”.

Оксид серы (IV) при растворении в воде образует моногидрат (уравнение 1), продуктами диссоциации которого являются гидросульфит-, пиросульфит- и сульфит- ионы (уравнения 2–4). Автопротолиз воды описывается уравнением (5).

